

Но, возможно, кристаллизация у разных марок может начинаться при разных толщинах. Поэтому были проведены опыты по истиранию восьми образцов одной марки – 2НСР. Полученные результаты сведены в таблицу 1, в первой колонке которой приведены значения удельной работы. Каждая цифра в этой колонке есть среднее значение 5-9 измерений. Во второй колонке – относительная погрешность ее измерения (ϵ), а в третьей – толщина образца (b). В таблице данные расположены по мере возрастания этой величины. Закономерное изменение относительной погрешности опыта, как в [2], при этом не наблюдалось: практически все толщины лент менялись в пределах ниже критической. В конце таблицы подведен итог: проставлено среднее значение, найденное примерно для 60 измерений удельной энергии:

$$6,18 \pm 0,28 \text{ МДж/кг}, \epsilon = 4,5\%.$$

Такое заметное повышение точности по сравнению с [2] достигнуто обработкой поверхности зажима, который прижимает образец к абразиву и одновременно связывает ленту с силоизмерителем. Оказывается, определять удельную энергию разрушения стёкол при их механическом диспергировании можно вдвое точнее, чем металлов находящегося в обычном кристаллическом состоянии.

Значение a , найденное для обычного металла 2НСР, составило

$$6,65 \pm 0,7 \text{ МДж/кг}, \epsilon = 10,5\%.$$

что, как и в [2], превышает значение этой же величины, найденной для лент.

Список публикаций:

[1] Глезер А. М. *Аморфно-нанокристаллические сплавы* / Глезер А.М., Шурыгина Н.А. — М.: Физматлит, 2013. — 450 с.

[2] Блинова Е.Ю., Соколова Н.М. // *Двадцатая Всероссийская научная конференция студентов-физиков и молодых учёных (ВНКСФ-20). Материалы конф., тезисы докл.*: Екатеринбург-Ижевск: издательство АСФ России, 2014. С. 104-105

Электронное строение графеновых нанолент, деформированных растяжением, сжатием

Перекрестова Ксения Владимировна

Волгоградский государственный университет

Лебедев Николай Геннадьевич, д.ф.-м.н.

Perekrestova.95@mail.ru

Актуальность исследования упругих характеристик графеновых нанолент [1, 2] обуславливается структурной чувствительностью их различных физических характеристик, в том числе и механических, а также зависимостью результатов теоретических расчетов от выбранного метода [3, 4]. Последовательное изучение зависимости электронного строения от геометрических параметров может найти широкое применение в разработке наноструктурированных преобразователей энергии, сенсоров и др.

Цель исследования заключается в исследовании электронного строения графеновых нанолент, деформированных растяжением (сжатием). Для достижения цели решались следующие задачи:

- построение геометрических моделей графеновых нанолент типа (H, L), где H – ширина ленты, а L – длина ленты, рассчитанные в элементарных ячейках.
- квантово-химический расчёт электронного строения графеновых нанолент, деформированных растяжением (сжатием), полуэмпирическим методом MNDO [5].
- расчет модулей упругости деформации растяжения (сжатия), как функции длины и ширины графеновых нанолент.

В качестве метода исследования, в работе использовался метод компьютерного моделирования, а именно полуэмпирический метод квантовой химии MNDO.

По итогам работы можно сделать следующие выводы:

Построены геометрические модели графеновых нанолент (H, L). Проведено моделирование деформации растяжения/сжатия, путем варьирования длин нанолент. Величина относительной деформации варьировалась в следующих пределах $\delta = \pm 0.01, \pm 0.07$.

На основе результатов, квантово-химических полуэмпирических расчетах показано, что энергия верхней занятой молекулярной орбитали (Евзмо) и энергия нижней вакантной молекулярной орбитали (Енвмо) – уменьшаются, с увеличением длины наноленты и величины δ .

Проведен расчет модуля упругости (модуля Юнга) графеновых нанолент (H, L) по следующим формулам:

$$C = \frac{1}{V_0} \cdot \left(\frac{\partial^2 E}{\partial \delta^2} \right) \quad (1)$$

где объем образца вычисляется по формуле:

$$V_0 = L_0 H_0 d, \quad (2)$$

где L_0 - длина недеформированного образца ленты; H_0 - ширина недеформированного образца ленты; d - толщина графенового моно слоя.

Рассчитана зависимость полной энергии наноленты как функция относительной деформации, аппроксимированная параболической зависимостью с квадратичным коэффициентом: $K = \frac{1}{2} \frac{\partial^2 E}{\partial \delta^2}$.

Путем преобразований формулы (1) и (2), получилась формула (3): $C = \frac{2 \cdot K}{L_0 \cdot H_0 \cdot d}$ (3)

Проведен аналитический расчет модуля Юнга графеновых нанолент, показано его монотонное убывание с ростом длины и ширины ленты (рис. 1 и 2).

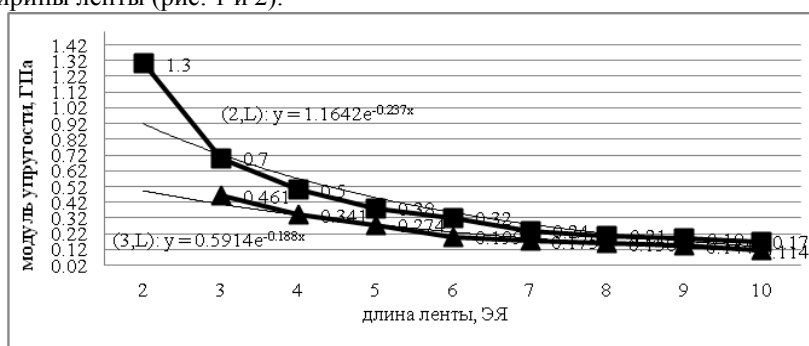


рис. 1 Зависимость модуля упругости графеновых нанолент зигзагообразного типа от длины ленты.

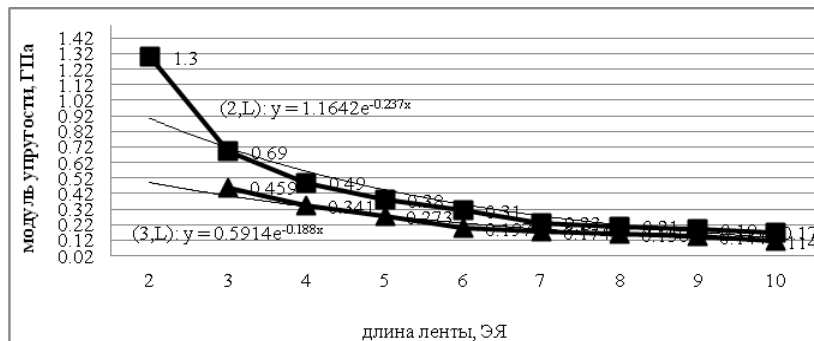


рис. 2 Зависимость модуля упругости графеновых нанолент зигзагообразного типа от длины ленты.

Список публикаций:

- [1] Чернозатонский, Л. А. Полупроводниковые наноструктуры на основе графена / Л.А. Чернозатонский, П.Б. Сорокин // Успехи физических наук. 2013. Том 183, выпуск № 2. – С.1-20.
- [2] Чернозатонский, Л. А. Новые наноструктуры на основе графена: физико-химические свойства и приложения / Л. А. Чернозатонский, П. Б. Сорокин, А. Артюх // Успехи химии. 2014. Том 83, выпуск №3. – С. 251-279.
- [3] Глухова, О. Е. Эмпирическое моделирование продольного растяжения и сжатия графеновых наночастиц и нанолент / О. Е. Глухова, А. С. Колесникова // Физика твердого тела. 2011. Том 53, выпуск № 23. – С. 1-6.
- [4] Глухова, О. Е. Теоретическое изучение зависимостей модулей Юнга и кручения тонких однослойных углеродных нанотрубок типа zigzag и armchair от геометрических параметров / О. Е. Глухова, О. А. Терентьев // Физика твердого тела. 2006. Том 48, выпуск № 7. – С. 1-7.
- [5] Лебедев, Н. Г. Методы квантовой химии для исследования электронного строения молекул и кристаллов: учебное пособие. В 3 частях. Часть-1. Метод Хартри-Фока / Н. Г. Лебедев. Волгоград: Издательство ВолГУ, 2010. – 116 с.